

# 計算アルゴリズムと量子化学計算

---

筑波大学大学院

システム情報工学研究科

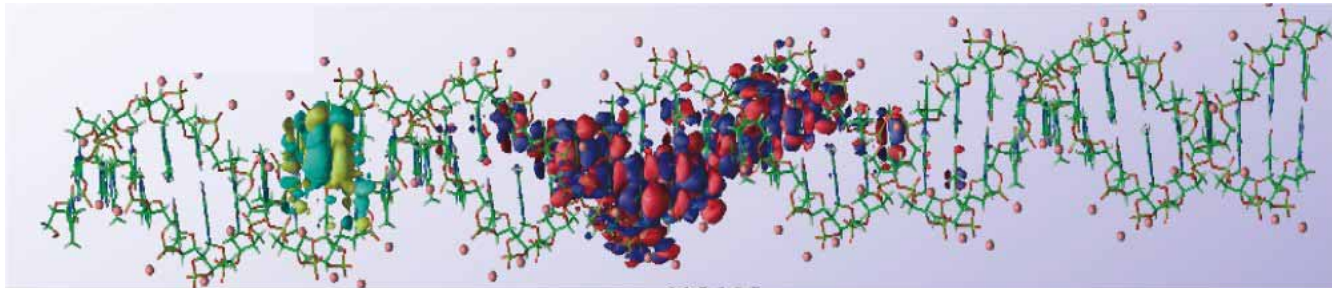
櫻井鉄也

# 分子軌道 (Molecular Orbital, MO)

---

タンパク質, 糖鎖などの巨大分子の活性部位特定

- ・基底関数による分子軌道の展開
- ・MO係数を求めるための方程式



2電子積分の計算量  $O(N^4)$

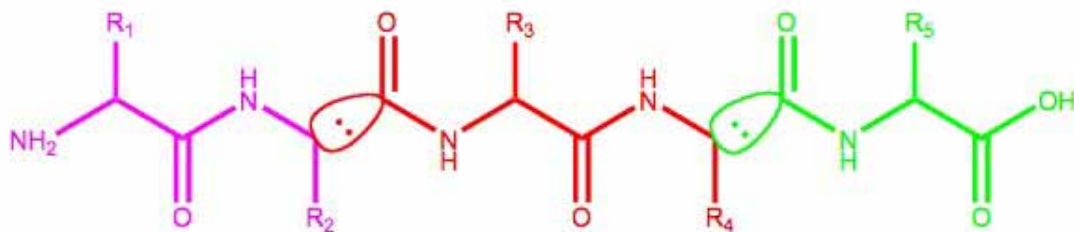
大規模な固有値問題を繰り返し解く

# フラグメント分子軌道(FMO)法

---

大きな分子

小さなフラグメントに分割



・計算量の削減, 高い並列性

FMO-MO法: FMOの結果を利用して分子軌道を計算

大規模一般化固有値問題

フロンティア軌道付近の数十個の固有ベクトル

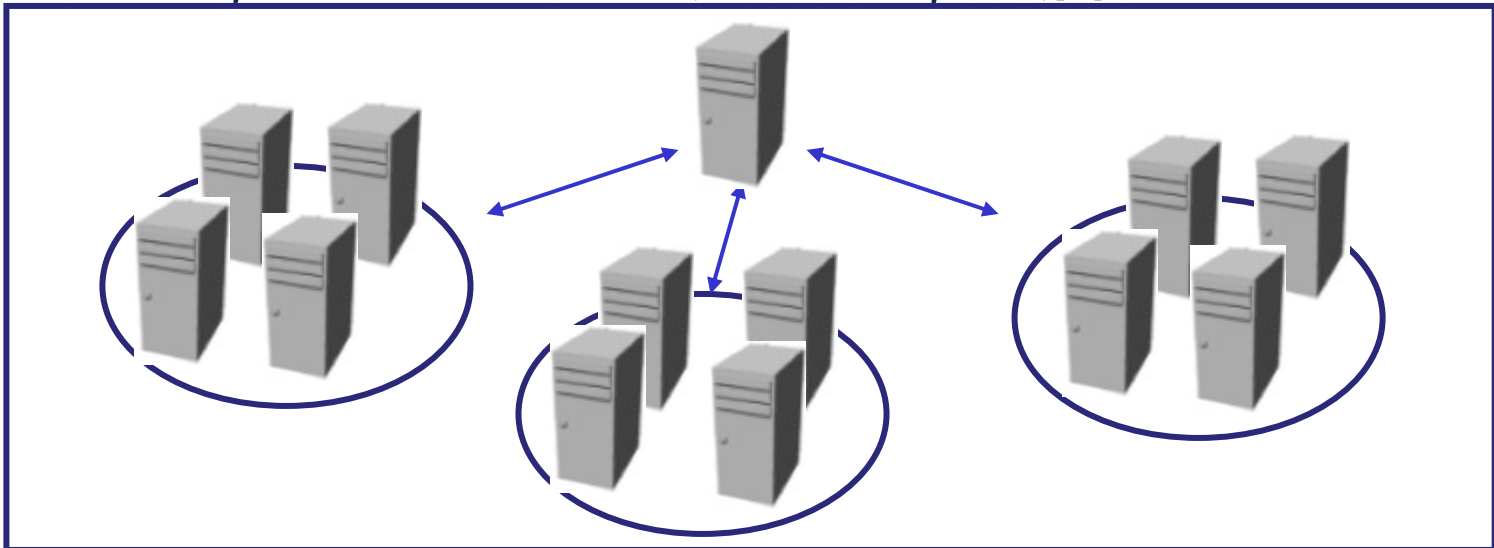
# 分散型の大規模計算

---

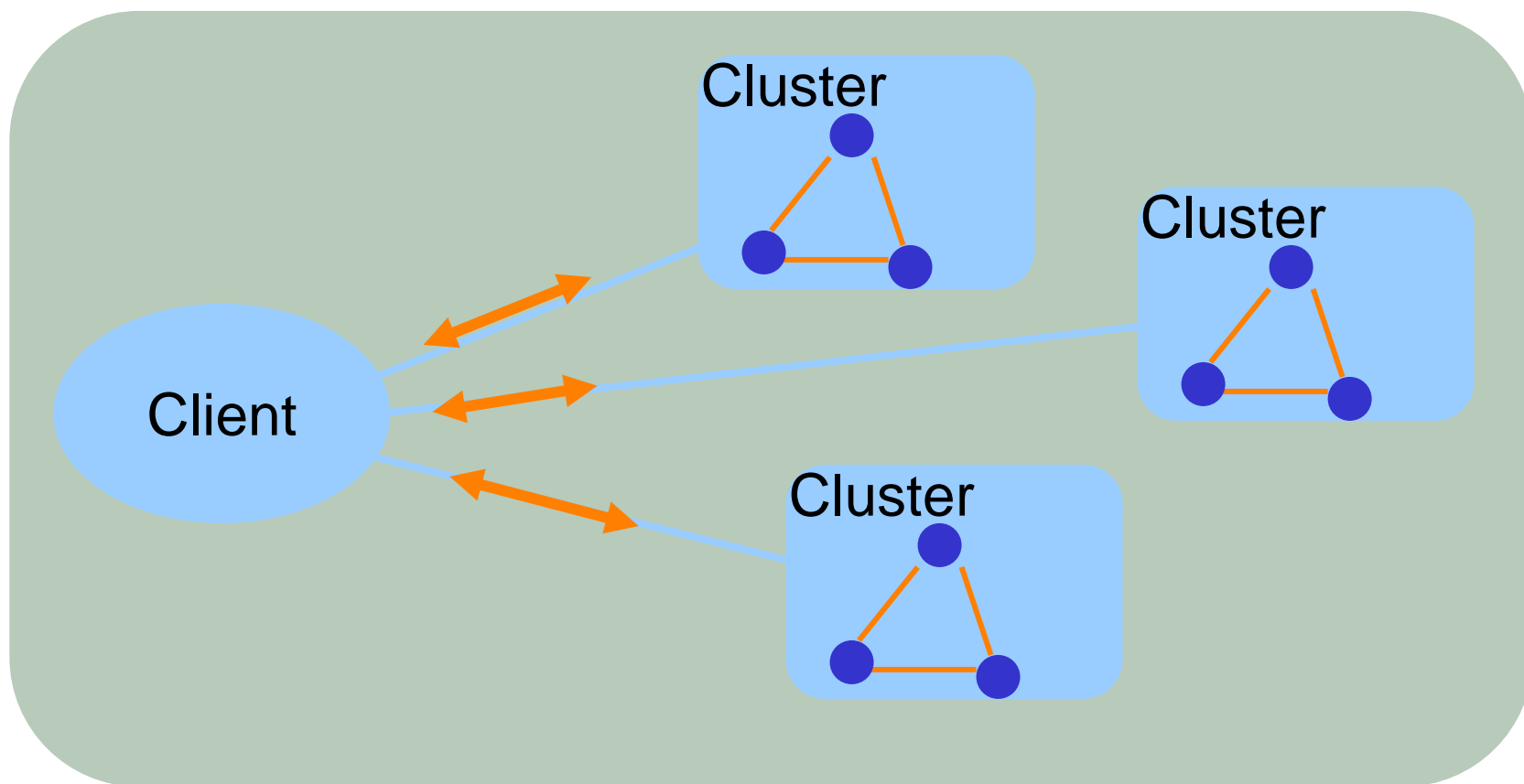
科学技術計算:

大規模な線形方程式, 非線形方程式, 固有値  
問題などが現れる      反復解法

計算処理, データ通信の局所化, 階層化

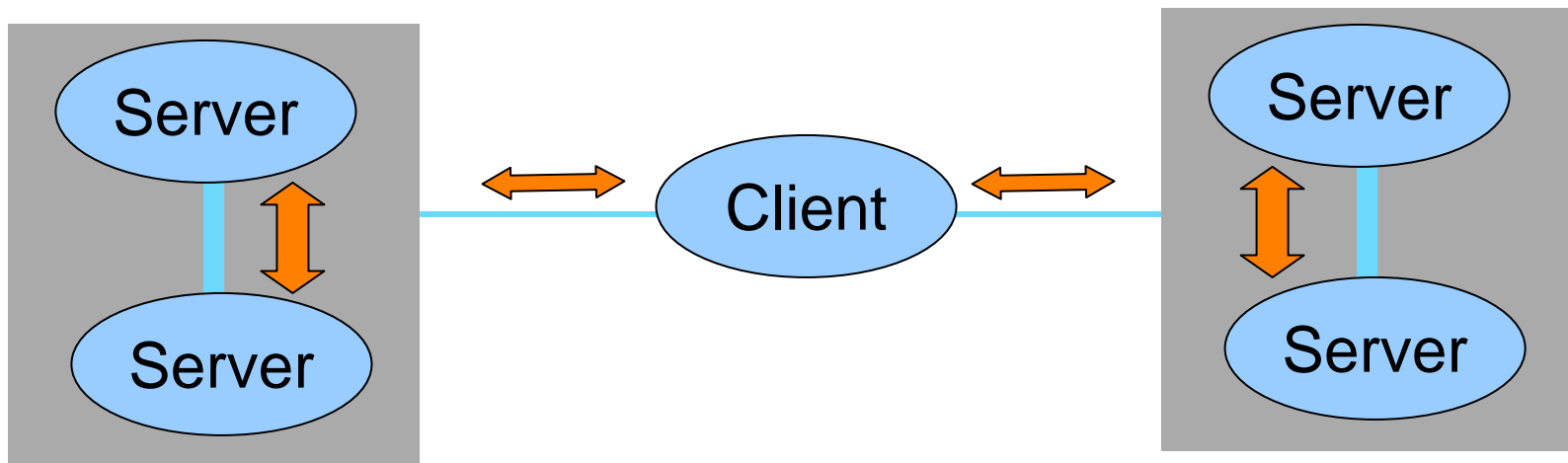
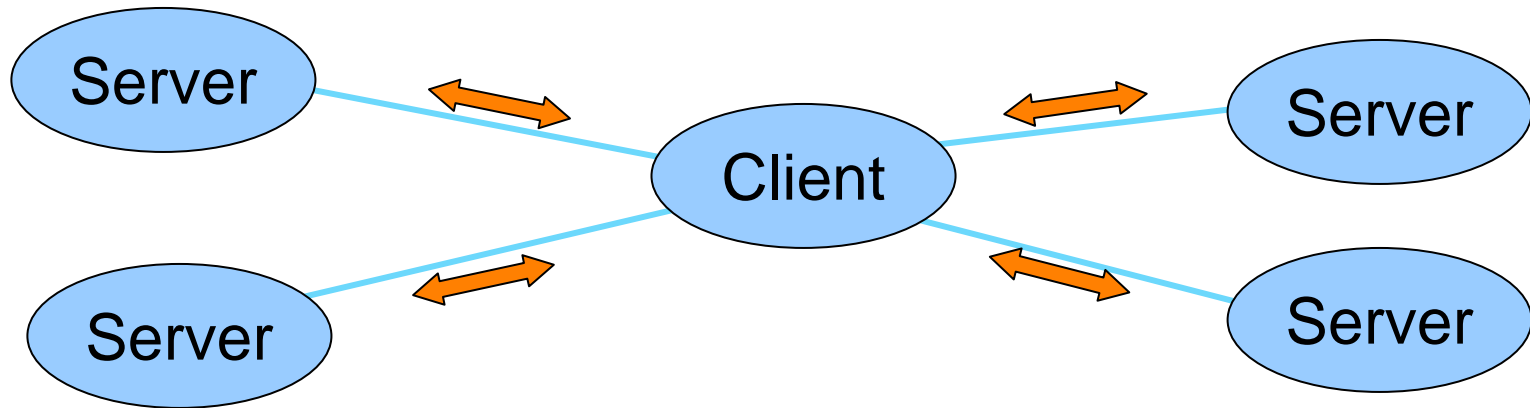


# 分散型の大規模計算



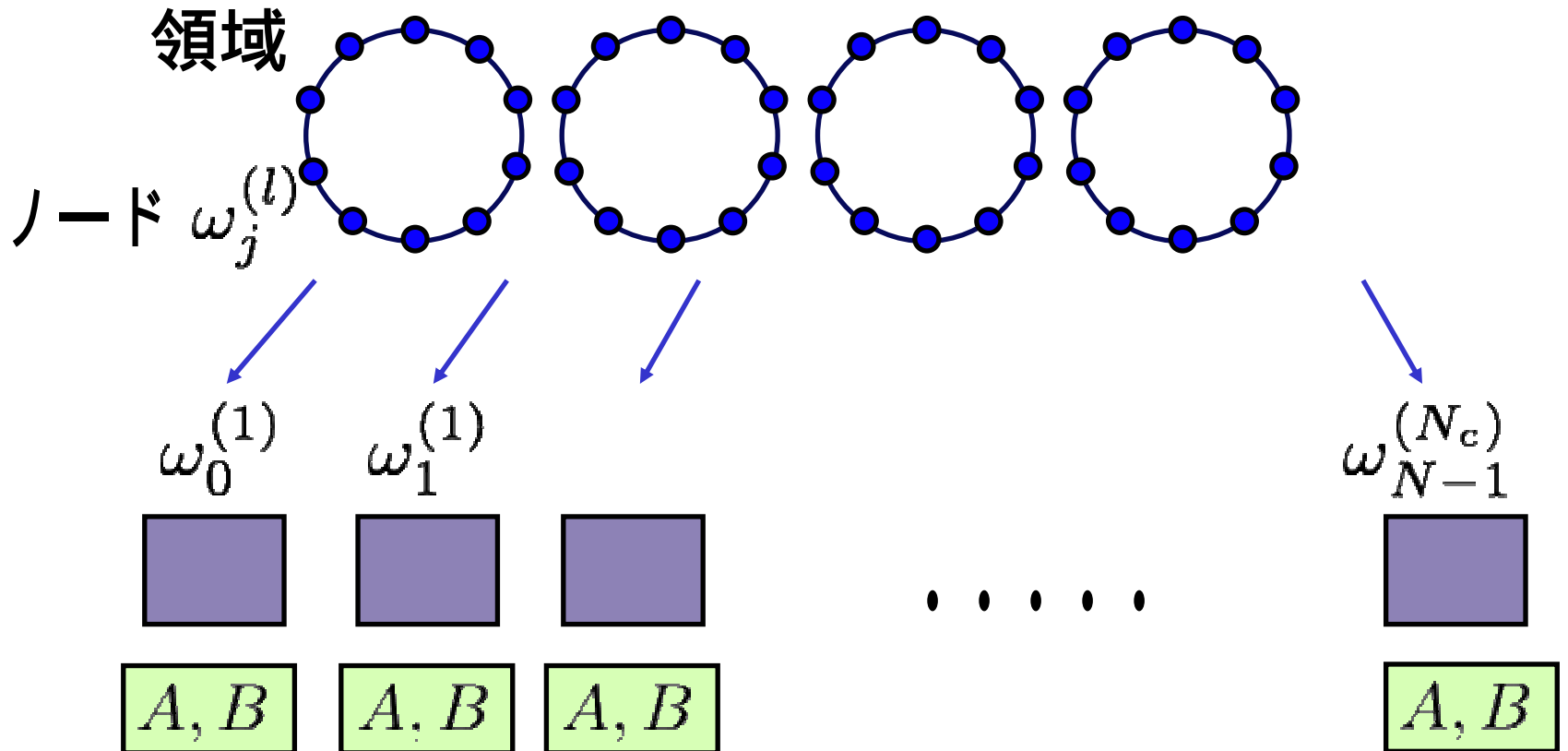
大規模クラスタ

# データ転送の階層化



# 局所情報を用いた固有値計算

固有値問題:  $Ax = \lambda Bx$



# テスト問題

---

Lysozyme :

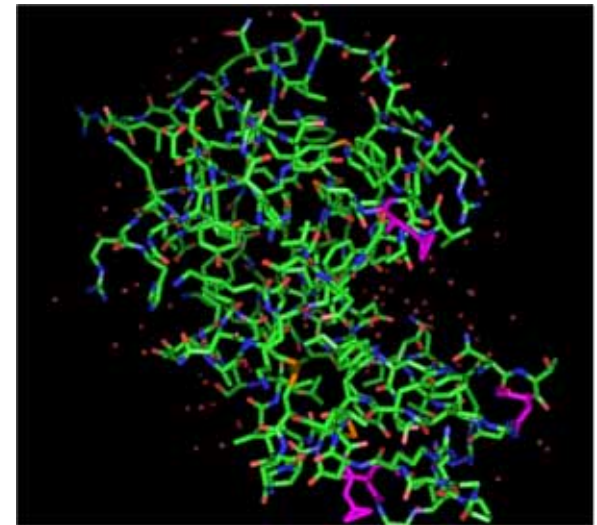
植物性細菌の細胞壁を壊し  
殺菌作用のある酵素

+ 水分子

A, B : Real symmetric

行列のサイズ : 20,758

非ゼロ要素数 : 10,010,416





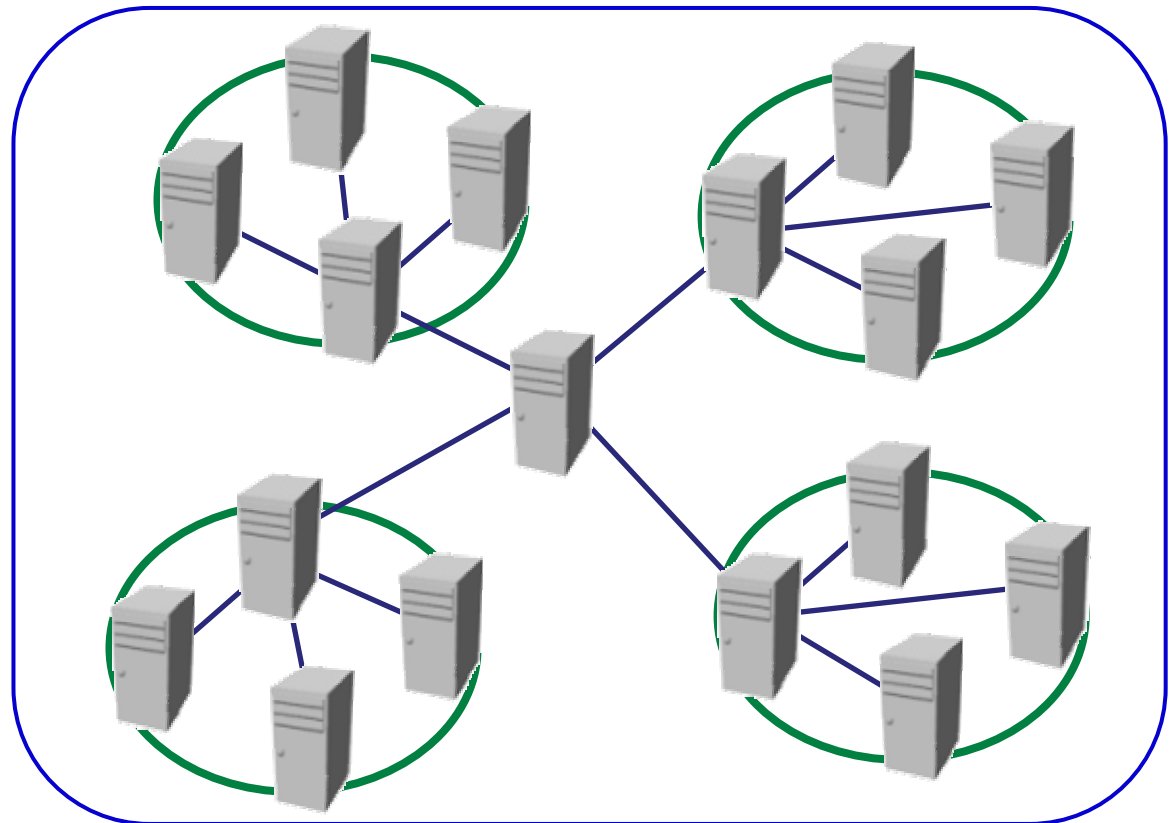
# テスト環境

---

AIST F32 Super Cluster 256 nodes

Xeon 3.06GHz

複数のグループに分け、グループ同士は直接通信しない



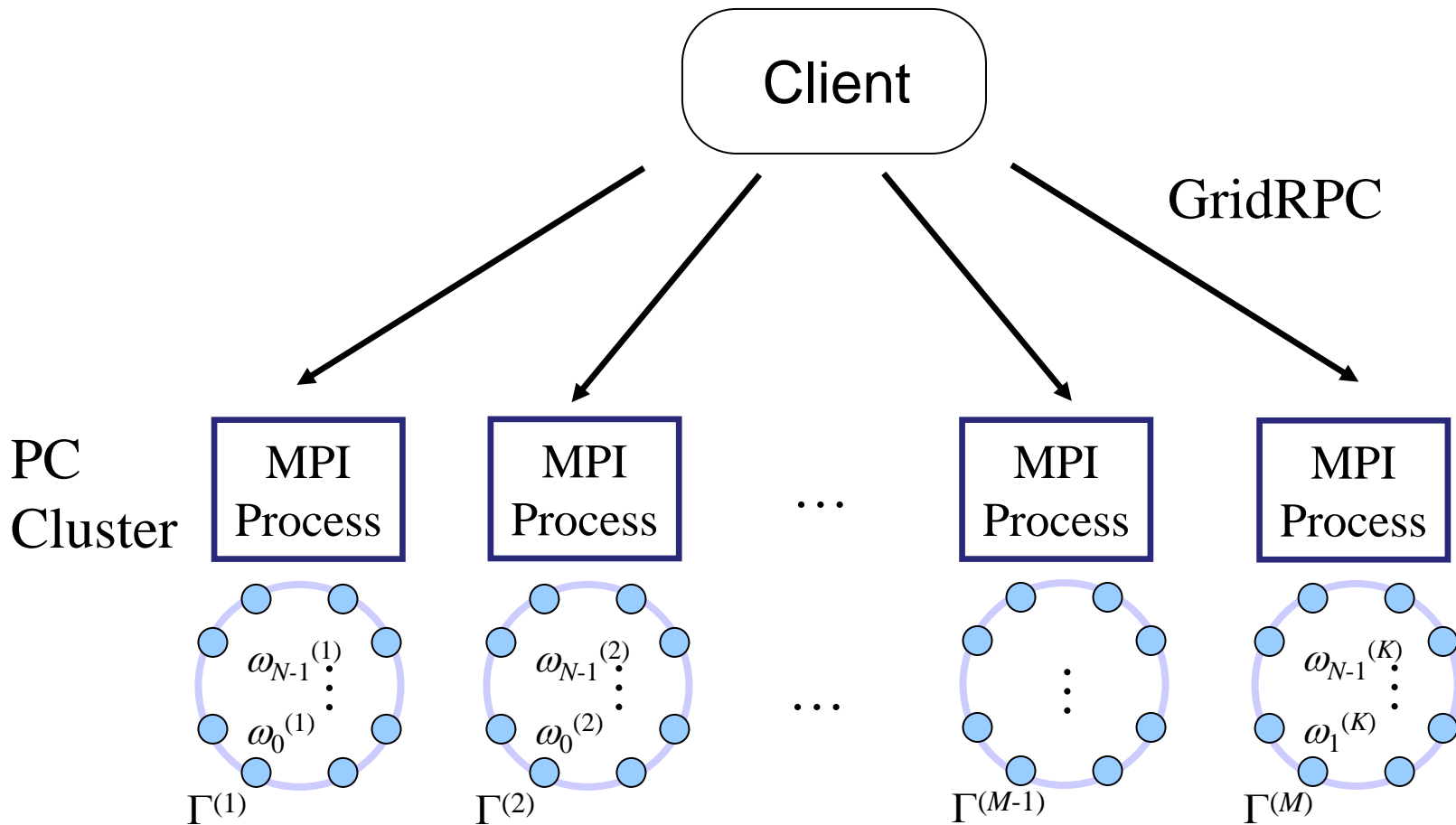
# 数値例

化学反応に関係するエネルギー付近に  
8個の円を配置 (20個の固有値)

Wall-clock time (sec)

		グループ数			
		1	2	4	8
各グループ のCPU数	1	1351	670	351	240
	2	901	447	238	159
	4	529	265	142	82
	8	348	173	86	50

# GridRPC/MPIハイブリッド



# 階層的並列化

